

кул, содержащих гетероатом получена аддитивная схема расчета физико-химических свойств. Рассчитаны $\Delta_f H^0$ газообразных алкантиолов.

Полином матрицы A смежности молекулярного графа G есть выражение $P_G(\lambda) = (-1)^n \det(A - \lambda E) = \lambda^n + a_1 \lambda^{n-1} + a_2 \lambda^{n-2} + \dots + a_n$, где E – единичная матрица, a_1, a_2, \dots, a_n – коэффициенты полинома, $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ – корни полинома.

Запишем матрицу смежности A' НМГ как матрицу с элементами [1]

$$a'_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } i \neq j \text{ и вершины } i \text{ и } j \text{ смежны} \\ 0 - & \text{в противном случае } (i \neq j) \\ g_i, & \text{если } i = j \end{cases} \quad (1)$$

Здесь g_i – вес i -ой вершины НМГ. Вершинам графа, которые соответствуют атомам углерода в молекуле, присвоен вес $g_i = 0$. Всем остальным вершинам (гетероатомам) МГ присвоен вес g_i , равный степени σ_i соответствующей вершины. КХП матриц A' НМГ имеют ясный структурный смысл: $a_0 = 1$, $a_1 = -r_i$ – степень вершины гетероатома со знаком минус, $a_2 = m_{c-c} \cdot r_i$ – число ребер, умноженное на степень вершины гетероатома; a_4 – число пар несмежных ребер и т.д. В общем случае можно записать

$$P_{НМГ} = \dot{a}_0 \dot{x}_0 + \dot{a}_1 \dot{x}_1 + \dot{a}_2 \dot{x}_2 + \dots \quad (2)$$

Здесь $\dot{x}_0, \dot{x}_1, \dot{x}_2, \dots$ – эмпирические параметры, представленные парциальными вкладами в свойство P структурных элементов (фрагментов) гетероатомной молекулы. Параметры (2) определены МНК по опытным данным.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗООБРАЗОВАНИЯ ПРИ ОКИСЛЕНИИ

ЖИДКИХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Bi – Ge

Аксёнова Д.С., Архипова Е.О., Белоусова Н.В.

Сибирский федеральный университет

660041, г. Красноярск, пр. Свободный, д. 79

Металлы и сплавы при их производстве в той или иной мере проходят через жидкую фазу, именно поэтому особое значение приобретают исследования взаимодействия жидких металлов с кислородом. Для того, чтобы лучше понимать механизм этого взаимодействия, необходимо знать сродство к кислороду каждого из компонентов сплава, их поверхностную активность, термодинамику процесса и т. д. Материалы на основе висмута и германия используются в ядерной физике и физике

высоких энергий, компьютерной медицинской томографии, низкофоно-вой спектроскопии и т.д.

Цель работы заключалась в изучении фазообразования при окислении жидких сплавов системы Bi – Ge.

Исследование кинетики окисления расплавов проводили методом высокотемпературной гравиметрии. Составы полученных оксидных плёнок определяли с помощью РФА на дифрактометре Shimadzu XRD 6000.

Были исследованы образцы системы Bi – Ge состава 10, 20, 40, 60, 80 ат.% Ge. Обобщив опыт предыдущих работ, мы решили отказаться от окисления при фиксированной температуре. Сплавы окисляли следующим образом: 2 мин при 1273 К → 5 мин при 953 К → 30 мин при 1273 К.

Полученные данные приведены в таблице.

Таблица – РФА окислы, полученной при окислении сплавов Bi –

Ge

Содержание Ge в исходном сплаве, ат. %	$\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$	$\alpha\text{-GeO}_2$	$\beta\text{-GeO}_2$	$\text{Bi}_2\text{Ge}_3\text{O}_9$	$\text{Bi}_{24}\text{GeO}_{38}$
10	-	-	-	-	100
20	3,61/0,94*	17,50/21,50	78,80/75,04	-/2,33	-
40	2,31/0,51	10,76/13,80	86,86/83,74	-/1,85	-
60	0,48/0,68	5,67/8,72	91,41/88,56	2,33/1,99	-
80	0,43/0,36	6,29/3,98	92,10/93,42	1,02/2,13	-

* воздух/аргон

Также были проведены исследования по окислению образцов этих же составов, но выдержанных предварительно в течение месяца. Установлен факт влияния времени выдержки для образца, содержащего 10 ат.% Ge: окисление выдержанного образца протекает медленнее, чем свежеприготовленного. Для других составов подобное не отмечалось. Установлено, что оксидная пленка, образовавшаяся на выдержанных сплавах, содержит чуть большие количества α -фазы GeO_2 и бенитоита и меньше содержит $\beta\text{-GeO}_2$. Главное отличие – появление оксида висмута, чего не отмечено в случае со свежеприготовленными сплавами.

Из полученных данных следует, что состав образующегося оксидного слоя зависит как от состава исходного сплава и его предыстории, так и от режима окисления.